
**VERDADERAS NANOESTRUCTURAS DE MÍNIMO POTENCIAL GLOBAL DE
LENNARD JONES Y MORSE**

**TRUE GLOBAL MINIMUM POTENTIAL NANOSTRUCTURES OF LENNARD
JONES AND MORSE**

Carlos Barrón Romero

Universidad Autónoma Metropolitana - Unidad Azcapotzalco

CDMX, México

ORCID * : 0000-0003-2435-6645

Fecha de envío: 05/05/2026

RESUMEN: El diseño molecular y el estudio de las nanoestructuras por Química Computacional, usando potenciales de tipo Van Der Waals, como lo son los potenciales de Morse y Lennard Jones es una forma de modelar y predecir nuevas estructuras de nano clústeres de partículas complementaria a las costosas investigaciones experimentales. Este trabajo presenta nuevos métodos de exploración para la determinación de clústeres de pocas partículas o nanoestructuras estables en el sentido de que su potencial sea mínimo local y global verdadero, i.e., tienen un potencial mínimo en una vecindad y su gradiente es muy pequeño y se preserva el de potencial más pequeño. Su importancia radica en que su potencial es estable y que estos clústeres de mínimo potencial global se han encontrado en la naturaleza o bien se han diseñado experimentalmente. Los nano clústeres de mínimo potencial global aparte de ser estables representan la configuración límite de mínimo potencial que se puede alcanzar, o sea, no hay otra de menor potencial y su determinación es un problema abierto porque solo se conocen los clústeres óptimos globales para 2, 3 y 4 partículas. En un trabajo reciente se estableció la optimalidad global del clúster de 13 partículas bajo el potencial de Lennard Jones usando la ecuación Característica de Euler sobre su















capa exterior. La metodología de este trabajo se sustenta teóricamente sobre formulaciones o variaciones de potenciales de Morse y del potencial de Lennard Jones. Los resultados muestran por primera vez que los conocidos posibles clústeres óptimos globales de 5 a 13 partículas conocidos algunos desde 1987 son las formas geométricas que corresponden a los verdaderos clústeres globales para sus respectivos potenciales.

PALABRAS-CLAVE: Química de materiales, Nanoquímica, Dinámica molecular.

ABSTRACT: Molecular design and the study of nanostructures using computational chemistry, for example, under Van der Waals potentials such as Morse and Lennard Jones potentials, is a way to model and predict new particle nanocluster structures that complements costly experimental investigations. This work presents new exploration methods for determining clusters of a few particles or stable nanostructures, meaning that their potential is a local or global minimum, i.e., they have a minimum potential in a neighborhood, and their gradient is very small, and the one with the smallest potential is preserved. Their importance lies in the fact that their potential is stable and that these minimum potential clusters have been found in nature or have been experimentally designed. Global minimum potential nanoclusters, besides being stable, represent the limiting configuration of minimum potential that can be achieved; that is, there is no other configuration with a lower potential, and their determination is an open problem because only the global optimum clusters for 2, 3, and 4 particles are known. In recent work, the global optimality of the 13-particle cluster under the Lennard Jones potential was established using the Euler characteristic equation on its outer shell. The methodology of this work is theoretically based on formulations or variations of Morse potential and the Lennard Jones potential. The results show for the first time that the known possible global optimal clusters of 5 to 13 particles, some of which have been known since 1987, are the geometric shapes that correspond to the true global clusters for their respective potentials.

KEYWORDS: Materials Chemistry, Nanochemistry, Molecular Dynamics.

Tabla 1. Los verdaderos clústeres de mínimo potencial global para n = 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12 y 13 partículas. Figura, nombre y potencial

 gMR4_N4T_B6 -6.0000 gLJ4_N4T_B6 -6.0000 gMO4_N4T_B6 -6.0000 gMC4_N4T_B6 -6.0000 gLC4_N4T_B6 -6.0000	 gMR5_N5BT_B9 -9.0449 gLJ5_N5BT_B9 -9.1039 gMO5_N5BT_B9 -9.0676 gMC5_N5BT_B9 -9.0003 gLC5_N5BT_B9 -9.0008	 gMR6_N6OC_B12 -12.4878 gLJ6_N6OC_B12 -12.7121 gMO6_N6OC_B12 -12.6315 gMC6_N6OC_B12 -12.0182 gLC6_N6OC_B12 -12.0234	 gMR7_N7PBP_B16 -16.2076 gLJ7_N7PBP_B16 -16.5054 gMO7_N7PBP_B16 -16.3288 gMC7_N7PBP_B16 -15.8831 gLC7_N7PBP_B16 -15.8524	 gMR8_N7PBP_B19 -19.3274 gLJ8_N7PBP_B19 -19.8215 gMO8_N7PBP_B19 -19.5159 gMC8_N7PBP_B19 -18.8837 gLC8_N7PBP_B19 -18.8542
 gMR9_N5BT_B23 -23.4172 gLJ9_N5BT_B23 -24.1134 gMO9_N5BT_B23 -23.6868	 gMR10_N4T_B27 -27.4733 gLJ10_N4T_B27 -28.4225 gMO10_N4T_B27 -27.8529	 gMR11_N5BT_B31 -31.5219 gLJ11_N5BT_B31 -32.7660 gMO11_N5BT_B31 -32.0288  gMC11_N7PBP_B30 -29.5961  gLC11_N4T_B30 -29.3948	 gMR12_N7PBP_B36 -36.4003 gLJ12_N7PBP_B36 -37.9676 gMO12_N7PBP_B36 -37.1056  gMC12_N4T_B34 -33.3323 gLC12_N4T_B34 -33.1448	 gMR13_N13IC_B42 -42.4399 gLJ13_N13IC_B42 -44.3268 gMO13_N13IC_B42 -43.3177 gMC13_N13IC_B42 -37.2589  gLC13_N13IR_B37 -36.7369